スピングラスの平均場理論

北大理 根本幸児　京大基研 高山 一

§1 序　スピングラスの理論的解析の多くは、その平均場極限である Sherrington-Kirkpatrick（SK）模型 — 全てのスピン間にランダムな相互作用の働くイジングスピン模型[1] — を通じて発展してきた。この系は有限温度で二次相転移を起こすことが知られているが、殊に興味深いのは、その低温相 — スピングラス相 — において、位相空間に多くの局所準安定状態が出現することである。スピングラス系が、相互作用のランダム性とフラストレーション効果によって多数の準平衡状態をもつであろうことは、例の得体の知れない凸凹の図をみせられるまでもなく容易に想像できるし、系がそれらの間を徐々に遷移することによって異常（非線型）長緩和現象を引き起こすであろうことも察しはつく。しかし、原理的な所からこのような状況を引き出して議論することが非常に難しい問題であることを考えると、SK模型が準安定状態を統計力学的に取り扱うことのできる一つの例である可能性があることは、十分注目に値することであると思われる。

SK模型を統計力学的に取り扱う方法は大別して２通りある。一つは、ランダム平均行った後で熱平均を行うレプリカ法[1]、もう一つは、ランダムな相互作用をそのままにして熱平均を先に行う Thouless-Anderson-Palmer（TAP）の方法である[2]。後者は、実スピン空間での描写を保っている点で理解しやすいが、ランダム平均を行うことが難しい問題となる。他方前者は、計算が多少楽になる反面、話がレプリカ空間にいってしまって物理的な意味を曖昧にしてしまう。最近、伊仏のグループによって、この意味づけ — レプリカ空間を通して計算される諸量と実スピン空間で与えられる物理量との対応 — が議論されているが[3)-5)]、はたしてどこまで本当かといえば、それが物理的"解釈"だけに、解析的にそれを調べる方法はない。そこでここでは、レプリカ法の計算による結果と、その"解釈"に従ってTAPの方法による実スピン空間において数値的に計算した結果が、どの程度比較できるものかを調べてみたい。

§2 TAPの自由エネルギー　SK模型のハミルトニアンは次式で与えられる；

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i , \qquad s_i = \pm 1 \qquad (1)$$

ここで相互作用の組 $\{J_{ij}\}$ は、各々分散が $\frac{1}{N}$（Nは全スピン数）、平均が（簡単の為）ゼロの独立なガウス分布に従う確率変数である。TAPは $\{J_{ij}\}$ と温度T、各々のスピンの磁化の組 $\{m_i = \langle s_i \rangle\}$ の関数として自由エネルギーの表式を与えた[2]。この表式は、外場の組 $\{h_i\}$ と $\{m_i\}$ とをルジャンドル変換することによって、次のように得られる；

$$F_{TAP} = -T \log \mathrm{Tr} \exp(-\mathcal{H}/T) + \sum_i h_i m_i$$

$$= \frac{T}{2}\sum_i \left\{ (1+m_i)\log\frac{1+m_i}{2} + (1-m_i)\log\frac{1-m_i}{2} \right\}$$

$$- \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} m_i m_j - \frac{1}{2T}\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}^2 (1-m_i^2)(1-m_j^2) + O(N^0) \qquad (2)$$

この F_{TAP} を m_i で微分してN連立状態方程式（ＴＡＰ方程式）が導き出される；

$$0 = \frac{\partial F_{TAP}}{\partial m_i} \equiv (\vec{\nabla} F_{TAP})_i$$

$$= T \tanh^{-1} m_i - \sum_j J_{ij} m_j + \frac{m_i}{T}\sum_j J_{ij}^2 (1-m_j^2) \qquad (3)$$

（実際は $h_i = \frac{\partial F_{TAP}}{\partial m_i}$ であるが、ここでは以下 $h_i = 0$ とする）。このＴＡＰ方程式は転移点以下（Ｔ＜１）で非自明解をもつが、特にその解の数がＮに対して指数関数的になることが知られている[7]。この莫大な数の解をそれぞれ準安定状態とみなせば、(3)を数値的に解くことによって、実スピン空間でのスピン配位として準安定状態を得ることができる。とはいえ、有限のＮに対するＴＡＰ方程式の非自明解は常に存在するとは限らず、むしろ存在しないことが多い。これは、熱力学的極限（$N\to\infty$）で、(3)の解が、F_{TAP} (2)の鞍点となっていることに起因する。そこで我々は、方程式の“近似解”として、$|\vec{\nabla} F_{TAP}|$ の極小を与える解を採用することにした[8]。こうすると、ほとんどの場合、その非自明解をみつけることができる。図１に示すように、$|\vec{\nabla} F_{TAP}|$ が $N\to\infty$ でゼロに近づくことから、この方法が、熱力学的極限で解に近づくという意味で、“よい近似法”であるということがいえよう。

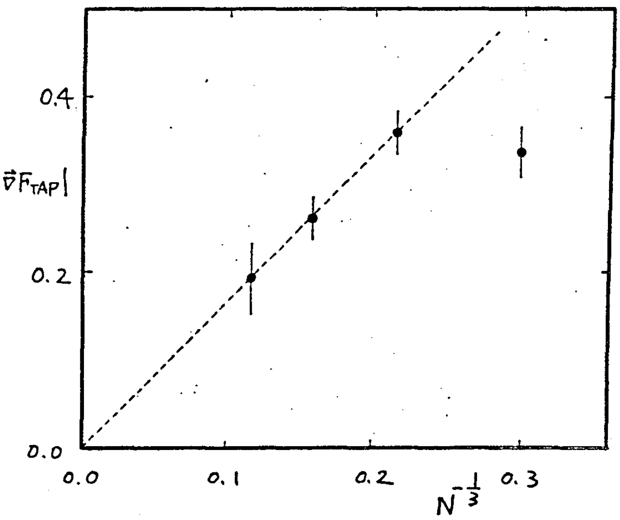

図１　$|\vec{\nabla} F_{TAP}|$ のＮ依存性

§３　レプリカ法の物理的解釈　　ＳＫ模型をレプリカ法で取り扱う際には、レプリカ対称性の破れ（Replica Symmetry Breaking；ＲＳＢ）を考慮しなければならないことが、de Almeida と Thouless によって示されてから[9]、その方法が様々試みられたが、現在生き残っているのは Parisi の方法である[10]。レプリカ法ではレプリカ間の相関が秩序パラメータ q となるが、ＲＳＢが起こると、q もそれに応じて複数個必要になってくる。Parisi はこの秩序パラメータの組が一つの関数 $q(x)$ （$0\leq x\leq 1$）で表されるようなＲＳＢの方法を提案した。それによって得られた結果は、物理的には矛盾のないものであったが、$q(x)$ 自体に物理的意味があるかどうかは不明であった。そこで（という訳かどうか）、多数

存在する準安定状態とこの $q(x)$ とを関連づけて解釈しようという試みがなされた。[3)]

ＴＡＰ方程式(3)の複数ある解に番号をつけて，α番目の解を $\vec{m}_\alpha \equiv \{m_{i,\alpha}\}$ とかくことにする。これをα番目の局所準安定状態とみなせば，系がこの状態にある確率 ― ボルツマン因子 ― P_α を次のように考えることができよう；

$$P_\alpha = Z^{-1} e^{-F_{TAP}(\vec{m}_\alpha)/T} \qquad (4\text{-}a)$$

$$Z^{-1} = \sum_\alpha e^{-F_{TAP}(\vec{m}_\alpha)/T} \qquad (4\text{-}b)$$

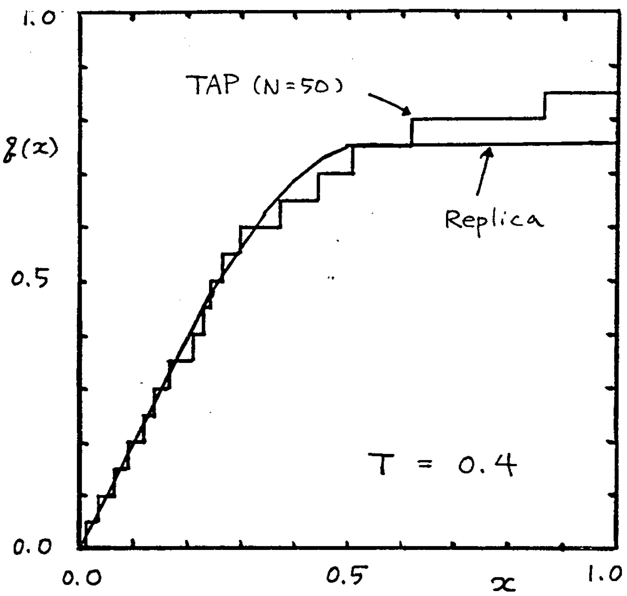

図２　秩序パラメータ　$q(x)$

これを用いると，熱平均値は $\langle\cdots\rangle = \sum_\alpha P_\alpha \langle\cdots\rangle_\alpha$ （$\langle\cdots\rangle_\alpha$ はα番目の局所安定状態における平均値．特に $m_{i,\alpha} = \langle S_i \rangle_\alpha$ ）と表されることになる。この関係を認めると，それが Parisi の ＲＳＢによる計算　の掛橋となって，次の関係が導き出される；

$$\Big[\sum_{\alpha\beta} P_\alpha P_\beta e^{y q_{\alpha\beta}} \Big]_J = \int_0^1 dx\, e^{y q(x)} \qquad (5\text{-}a)$$

ここで $[\cdots]_J$ は $\{J_{ij}\}$ についてのランダム平均，$q_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{N} \vec{m}_\alpha \cdot \vec{m}_\beta$ でα番目とβ番目の状態の重なりである。あるいは，y についてラプラス変換すれば，

$$\Big[\sum_{\alpha\beta} P_\alpha P_\beta\, \delta(\hat{q} - q_{\alpha\beta}) \Big]_J = \frac{dx(q)}{dq}\Big|_{q=\hat{q}} \equiv \mathcal{P}(\hat{q}) \qquad (5\text{-}b)$$

（$x(q)$ は $q(x)$ の逆関数）となる。つまり，局所準安定状態間の重なりの確率分布関数 $\mathcal{P}(q)$ が，$q(x)$ を用いて表わされるという訳である。（5-b）の左辺は直接ＴＡＰ方程式の解から，右辺は Parisi の ＲＳＢの方法からそれぞれ計算できる。そこで，（5-b）の関係から $q(x)$ を計算して，両者を比較したのが図２である。実際には，有効な解を求めるのが大変であることもあって，ランダム平均のサンプリングはそう多くはないが（24サンプル），半定量的にはよい一致をみせているといえよう。他に，縮約された秩序パラメータの温度変化も我々によって調べられているが[11)]，同程度の一致を示している。

§4　内部磁場分布

$q(x)$ を計算する方法の一つとして，補助関数 $P(x,y)$, $M(x,y)$ $(0 \leqq x \leqq 1, -\infty < y < \infty)$ を用いるものが考えられている[5),12)]。これを用いることによって，

$$\left(\frac{1}{2} \frac{dq}{dx} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \right) M(x,y) = -\frac{1}{T} \frac{dq}{dx} M(x,y) \frac{\partial}{\partial y} M(x,y)$$

$$M(x=1, y) = \tanh \frac{y}{T} \tag{6-a}$$

$$\left(\frac{1}{2} \frac{dq}{dx} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial x} \right) P(x, y) = \frac{1}{T} \frac{dq}{dx} \frac{\partial}{\partial y} P(x, y) M(x, y)$$

$$P(x=0, y) = (2\pi q(0))^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(y-h)^2}{2q(0)}} \tag{6-b}$$

$$q(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \; P(x, y) \{ M(x, y) \}^2 \tag{6-c}$$

という自己無撞着方程式が立てられる。図2の$q(x)$も、この方程式を解いて得られたものである。ところで前節の解釈を進めてゆくと、任意の整数nについて、

$$\left[\frac{1}{N} \sum_i m_{i\alpha}^n \right]_J = \int_{-\infty}^{\infty} dy \, P(1, y) \tanh^n \frac{y}{T} \tag{7}$$

という関係が示されるので、[5] $P(1, y)$は、各々の局所安定状態の内部磁場分布という意味をもつ。そこで、TAP方程式の解$\vec{m}_\alpha$から求めた分布と、(6)からの$P(1, y)$を比較してみたのが図3である。T=0.2で若干のずれは見られるものの、ほぼ一致しているとみることができよう。

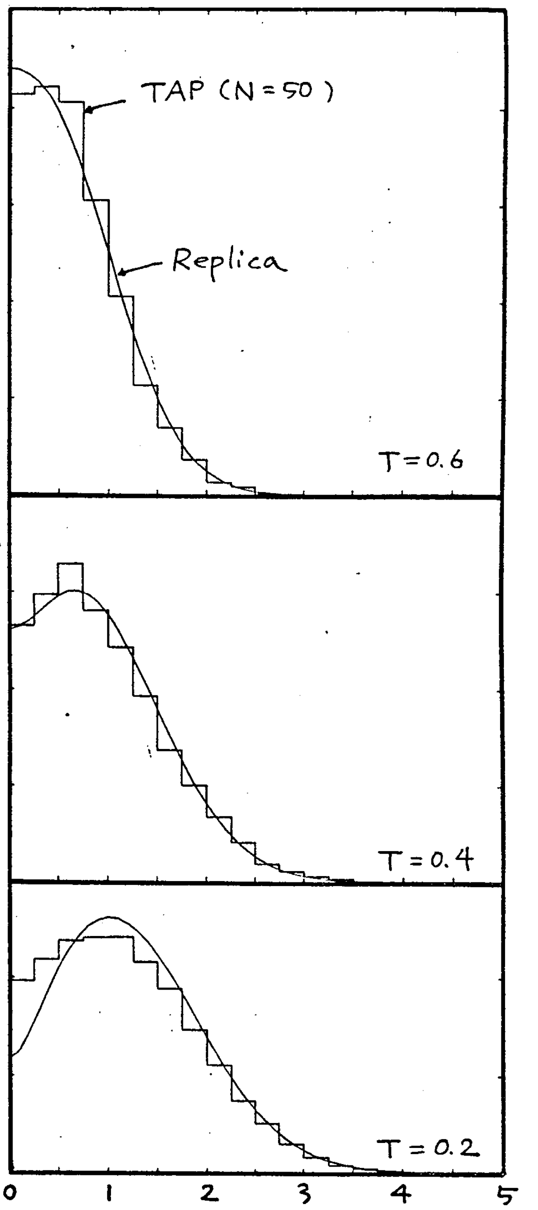

図3　内部磁場分布の比較

§5 結語

以上、簡単な量について、N次元実スピン空間での計算と0次元(∞次元？)レプリカ空間でのそれとを比較してみた。これまでのところは、積極的にレプリカ法の解釈を否定する要因はないといえる。しかし完全に肯定してよいとまではいかないであろう。例えば、この解釈によれば、準安定状態の集合が超計量空間(ultrametric space)を構成することになるが、[4,5] このことはまだ確められていない。本当だとすれば、SK模型の準安定状態は階層的に分類され、それを反映して、転移点以下連続的に無限回の転移を起こしている可能性があって興味深い(これに類似のことは、実スピン空間でもみられる[7])。これからの課題として残される問題の一つである。

REFERENCES

1) D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1972
2) D. J. Thouless, P. W. Anderson end R. G. Palmer, Philos. Mag. 35 (1977) 1513
3) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1946
4) M. Mezard, G. Parisi, N. Soulas, G. Toulouse and M. Virasoro, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1156, J. Physique 45 (1984) 843
5) M. Mezard and M. A. Virasoro, J. Physique 46 (1985) 1293
6) T. Plefka, J. Phys. A15 (1982) 1971
7) A. J. Bray and M. A. Moore, J. Phys. C12 (1979) L441
8) K. Nemoto and H. Takayama, J. Phys. C18 (1985) L529
9) R. J. L. de Almeida and D. J. Thouless, J. Phys. A11 (1978) 983
10) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1754, J. Phys. A13 (1980) L115, 1101, 1887
11) K. Nemoto and H. Takayama, J. Magn. Magn. Mater. 54-57 (1986) to appear
12) H. J. Sommers and W. J. Dupont, J. Phys. C32 (1984) 5785